

PEMANFAATAN SIMULASI KOMPUTER DALAM TEKNIK KIMIA

Oleh :

Wahyudi Budi Sediawan dan Moh Fahrurrozi *)

Intisari

Dalam bidang teknik kimia, pendekatan secara matematis akhir-akhir ini makin banyak digunakan. Hal ini disebabkan oleh tersedianya komputer yang makin lama makin canggih dan murah sehingga hitungan yang dulu dianggap tidak feasible sekarang menjadi feasible. Dalam makalah ini ditunjukkan penggunaan pendekatan matematis yang hitungannya dilaksanakan dengan komputer dalam penelitian, perancangan alat dan optimasi di bidang teknik kimia.

Pengantar

Karena proses-proses teknik kimia harus dijalankan secara ekonomis, maka suatu pedoman pokok yang selalu dipakai adalah :

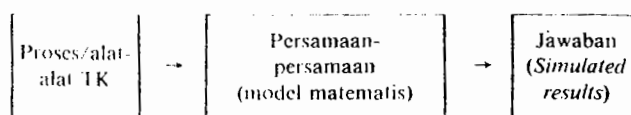
"Pengorbanan yang diberikan harus secukupnya saja".

Jadi dalam hal ini, setiap pengorbanan/pengeluaran (misal bahan baku, bahan bakar, ukuran alat, dan lain-lain) diusahakan untuk sejauh mungkin diketahui berapa yang diperlukan, lalu berdasar hal tersebut pengorbanan/pengeluaran diberikan sedikit di atas kebutuhan tersebut (over design). Makin tinggi ketepatan perkiraan kebutuhan tersebut, bisa makin kecil "over design" yang harus diberikan.

Perkiraan besarnya pengorbanan-pengorbanan yang diberikan tersebut dapat dilakukan berdasar berbagai pendekatan, misalnya coba-coba, perasaan dan analisis kuantitatif (perhitungan).

Perkembangan terakhir menunjukkan bahwa analisis kuantitatif (pendekatan matematis) makin berperan. Hal ini dimungkinkan terutama karena tersedianya alat-alat hitung yang makin canggih dan makin murah (dalam hal ini komputer). Hitungan-hitungan yang dulu tidak *feasible* sekarang menjadi *feasible*.

Pendekatan matematis, umumnya mengikuti pola seperti bagan berikut (Mickley, 1957) :



Jadi dalam hal ini ada 2 tahapan (langkah) pokok, yaitu penyusunan persamaan-persamaan matematis yang bisa mendekati proses yang ditinjau (*mathematical modeling*) dan penyelesaian persamaan-persamaan matematis yang terbentuk itu.

Langkah pertama (*mathematical modeling*) memerlukan penguasaan hukum-hukum dasar teknik kimia yang mantap (*chemical engineering tools*, yaitu neraca massa, neraca energi, kesetimbangan, proses kecepatan). Pendidikan tekni kimia modern juga sudah disesuaikan dengan kebutuhan tersebut. Pendidikan lebih bersifat *centered around the physical principles* daripada *centered around devices*. Pola pendidikan ini bersifat lebih flexible dan tahan lama, meskipun alat-alat/proses-proses berubah setiap saat. Sarjana-sarjana teknik kimia yang dihasilkan diharapkan siap untuk berkembang (bukan siap pakai). Pada langkah pertama ini, penguasaan matematika jelas sangat diperlukan. Yang lebih dibutuhkan di sini adalah pemahaman konsep-konsep matematika, dan hubungan konsep-konsep tersebut dengan proses-proses fisis dan kimiawi. Kemampuan/ketrampilan analitis (integrasi penyelesaian persamaan diferensial dan lain-lain) kurang diperlukan. Pada penyusunan model matematis ini kemampuan menyederhanakan persoalan (asumsi-asumsi) sangat diperlukan. Pada umumnya, tak ada peristiwa fisis yang bisa disusun model matematisnya tanpa

*) Staf Pengajar Jurusan Teknik Kimia FT-UGM.

penyederhanaan-penyederhanaan. Perlu dicatat pula bahwa model matematis yang tersusun untuk suatu peristiwa yang sama, bisa bermacam-macam, tergantung asumsi-asumsi yang dipakai. Model matematis yang dipilih diusahakan tidak terlalu rumit, tapi masih bisa mendekati peristiwa yang sebenarnya.

Langkah kedua, yaitu penyelesaian persamaan-persamaan matematis yang terbentuk, dapat dijalankan secara analitis maupun numeris. Penyelesaian analitis bersifat *exact*, tetapi hanya bisa dipakai untuk sebagian kecil model matematis saja (yang sederhana), sehingga dalam praktek hitungan teknik kimia akhir-akhir ini, kurang terpakai. Yang lebih sering terpakai adalah penyelesaian numeris. Penyelesaian numeris ini sebenarnya hanya bersifat pendekatan, tapi dalam bidang teknis kimia, ini sudah dapat diterima (*acceptable solution*). Kelemahan lain penyelesaian numeris, adalah diperlukan hitungan-hitungan yang banyak sekali. Tapi dengan adanya komputer, hal ini dapat diatasi.

Karena besarnya peran komputer dalam analisis kuantitatif ini, maka proses tersebut sering disebut simulasi komputer. Dalam hal ini, seolah-olah peristiwa yang sebenarnya ditiru (disimulasi) dengan komputer.

Dalam makalah ini, contoh peran simulasi komputer dalam teknik kimia ditunjukkan dalam tiga kelompok kegiatan yaitu penelitian, perancangan alat dan optimasi.

Penelitian

Perhitungan dengan komputer dapat dipakai untuk mengecek kebenaran suatu model matematis, berdasar data percobaan, dan sekaligus mengevaluasi harga tetapan-tetapan yang ada dalam model matematis tersebut. Hal ini dilaksanakan dengan membandingkan *simulated results* dengan data percobaan fisis. Proses ini akan ditunjukkan dengan contoh berikut.

Dalam suatu percobaan difusivitas dalam cairan (Piret, 1951), suatu tabung kapiler, salah satu ujungnya terbuka, sedang ujung lainnya tertutup, mula-mula diisi dengan larutan zat A misalnya dengan konsentrasi tertentu. Mulai suatu saat, tabung kapiler diletakkan dalam aliran solven murni yang arahnya tegak lurus sumbu tabung kapiler sehingga terjadi

difusi solute dalam cairan dalam tabung kapiler yang arahnya sejajar sumbu tabung kapiler. Dalam hal ini, dianggap konsentrasi A pada ujung tabung kapiler yang terbuka selalu nol. Persen A tersisa (E) dalam tabung kapiler terhadap A mula-mula pada berbagai waktu (t) dan panjang pipa kapiler (L) dianalisis. Data yang diperoleh :

| | | | | | | |
|---|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $t/L^2, \frac{\text{detik}}{\text{cm}^2}$ | 0,741 | 1,160 | 2,838 | 3,689 | 8,805 | 17,03 |
| E (%) | 87,8 | 84,2 | 75,1 | 71,2 | 54,1 | 36,8 |

| | | |
|---|-------|-------|
| $t/L^2, \frac{\text{detik}}{\text{cm}^2}$ | 28,97 | 36,50 |
| E (%) | 19,6 | 14,2 |

Model matematis yang diajukan, setelah diselesaikan secara analitis, menghasilkan persamaan berbentuk

$$E = \frac{800}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^2} \exp \left[- \frac{(2n-1)^2 \pi^2 D_L t}{4L^2} \right] \dots \dots (1)$$

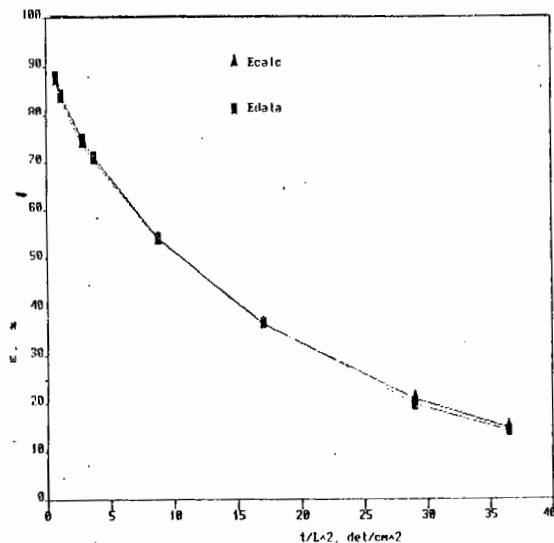
Dalam hal ini persamaan (1) dapat diganti dengan suatu penyelesaian numeris. Ingin diketahui apakah model matematis yang diajukan tersebut cocok, dan sekaligus ditentukan harga difusivitas (D_L) yang sesuai.

Dipilih harga D_L yang memberikan *sum of squares of errors*

$$S = f(D_L) = \sum (E_{\text{calc}} - E_{\text{data}})^2 \dots \dots \dots (2)$$

yang minimum. Dalam hal ini E_{calc} adalah E hasil simulasi (dihitung dengan persamaan (1)) dan E_{data} adalah E hasil percobaan. Harga D_L tersebut dianggap D_L terbaik. Minimasi S dengan variabel D_L tersebut dijalankan dengan cara *golden section* (Rudd, 1968), dan perhitungan dijalankan dengan komputer. Setelah D_L terbaik diketahui, maka dihitung harga-harga E dengan persamaan (1), dengan harga D_L terbaik tersebut. Bila harga-harga E terhitung cukup dekat dengan harga-harga E data, maka model matematis dianggap cocok, dan sekaligus harga D_L terbaik tersebut dianggap D_L yang sesuai. Perbandingan E_{calc} menggunakan D_L terbaik ($1,8920 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{detik}$) dengan E_{data} ditunjukkan dalam gambar 1. Terlihat

bahwa E_{calc} cukup dekat dengan E_{data} , sehingga dapat disimpulkan bahwa model matematis yang diajukan cocok dan harga D_L yang sesuai = $1,8920 \cdot 10^{-2}$ cm²/detik.



Gambar 1. Hubungan antara % solut tersisa dengan $1/L^2$

Perancangan Alat

Simulasi komputer dapat dipakai untuk perancangan suatu alat, baik alat pabrik maupun alat untuk percobaan laboratorium (agar percobaan mudah dijalankan dan data percobaan dapat diamati dengan mudah dan teliti). Dalam hal ini disusun model matematis untuk alat yang akan dirancang, kemudian persamaan-persamaan matematis tersebut diselesaikan dengan komputer. Dengan memasukkan harga-harga kondisi operasi dan ukuran alat yang tertentu, maka dengan menggunakan program komputer tersebut, dapat dihitung unjuk kerja dari alat tersebut. Kemudian dengan mencoba berbagai kondisi operasi dan ukuran alat, dan mengamati unjuk kerjanya (dari simulasi komputer), maka kondisi operasi dan ukuran alat yang relatif baik dapat dipilih. Dengan perkataan lain, di sini seolah-olah dilakukan suatu *experiment* tanpa memakai model fisik alat. Keuntungan perancangan dengan simulasi komputer ini adalah bahwa cara ini lebih murah, mudah, cepat dan aman dikerjakan, dibandingkan dengan model fisik, meskipun validitasnya kalah dibanding model fisik. Validitas dari simulasi komputer tersebut sebelumnya perlu

dicek dengan membandingkan hasil simulasi dengan beberapa model fisik. Dua contoh berikut (perancangan reaktor tabung dan rotary drier) diharapkan dapat menggambarkan proses perancangan alat dengan simulasi komputer tersebut.

Reaksi fasa gas, exotermis order 2

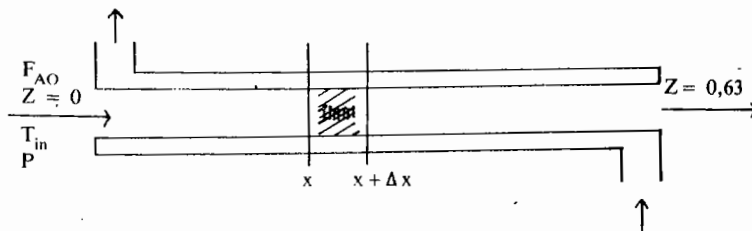


akan dijalankan dalam suatu reaktor tabung yang dianggap *plug flow*, yang bekerja non-adiabatis non-isothermal. Cairan pendingin mengalir di luar tabung. Jumlah cairan pendingin cukup besar, sehingga perubahan suhu pendingin dapat diabaikan. Tekanan dianggap tetap. Harga k dan panas reaksi mengikuti persamaan

$$k = A \exp \left(- \frac{E}{RT} \right) \dots \dots \dots (3)$$

$$\Delta H_R = \Delta H_R^0 + (2C_{pB} - C_{pA})(T - T_{ref}) \dots (4)$$

Data-data fisis diketahui (A , E , ΔH_R^0 , C_{pA} , C_{pB}), demikian pula harga koefisien perpindahan panas antara reaktan dan pendingin. Umpan berupa A murni, berjumlah $F_{Ao} = 10$ gmol/detik. Suhu referensi 298 K. Gas dapat dianggap ideal. Konversi yang diinginkan 0,63. Ingin dicari kondisi operasi (suhu dan tekanan umpan masuk, suhu pendingin) dan ukuran alat yang baik dipakai, dengan simulasi komputer.



Model matematis untuk reaktor tersebut adalah

$$\frac{dZ}{dx} = \frac{\pi p^2 D^2}{4 F_{Ao} R^2} \left(\frac{k}{T^2} \right) \left(\frac{1-Z}{1+Z} \right)^2 \dots \dots \dots (5)$$

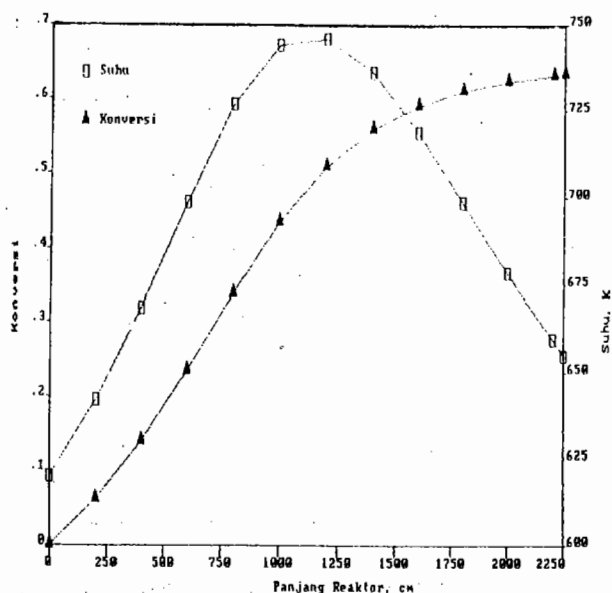
$$\frac{dT}{dx} = \frac{-F_{Ao} (\Delta H_R) \frac{dZ}{dx} - \pi D U (T - T_c)}{F_{Ao} (1-Z) C_{pA} + 2 F_{Ao} Z C_{pB}} \dots (6)$$

dengan boundary conditions

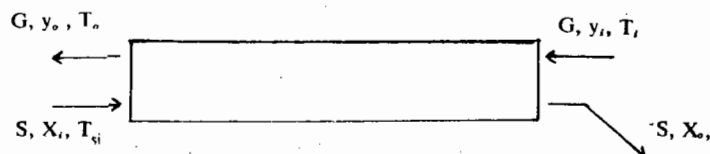
$$x = 0; Z = 0; T = T_{in} \dots \dots \dots (7)$$

Dalam hal ini x = panjang reaktor, Z = konversi dan T = suhu (K). Persamaan-persamaan tersebut diselesaikan secara numeris dengan cara Modified Euler, dengan bantuan komputer. Hasil simulasi komputer yang memberikan unjuk kerja reaktor yang baik ditunjukkan dalam gambar 2. Dalam hal ini $E/R = 10000$ K, $F_{Ao} = 10$ gmol/det, $T_{in} = 620$ K, $D = 4$ cm, $P = 3$ atm, $C_{pA} = 7$ cal/gmol/K, $C_{pB} = 5$ cal/gmol/K, $U = 0,006$ kal/det/cm²/K, $T_c = 530$ K, $A = 6,3 \cdot 10^{11}$ cm³/gmol/det, $\Delta H_R = -6000$ kal/gmol, $Z_{out} = 0,63$.

Bahan padat yang mengandung air 0,1466 g air, berjumlah 128,4 g pdt kering akan di-
g pdt + kering
detik
keringkan sampai kadar airnya menjadi 0.01
g air
g pdt kering, dengan udara panas, dalam suatu
rotary drier. Data percobaan secara batch menunjuk-
kan, bahwa kecepatan pengeringan tetap terjadi di
atas kadar air 0,05 g air, sedang di ba-
g pdt kering
wahnya, kecepatan pengeringan turun secara linier.
Bahan padat masuk drier pada 305 K. Sifat fisis bahan-
bahan diketahui. Ingin dipilih kondisi operasi dan
ukuran rotary drier yang bisa dipakai (Herlina, 1990).



Gambar 2. Hubungan suhu dan konversi dengan panjang reaktor



Model matematis yang tersusun sebagai berikut :
Neraca massa air dan panas dalam padatan :

$$\frac{dX}{dz} = -k_y a \frac{\pi D^2}{4 S} (y^* - y) \dots \dots \dots (8)$$

$$\frac{dT}{dz} = \left\{ Ua \frac{\pi D^2}{4} (T - T_r) - k_y a \frac{\pi D^2}{4} (y^* - y) [C_{p_{gH_2O}}(T - T_r) + \lambda_{TR}] \right. \\ \left. - S C_{p_{IH_2O}}(T_r - T_r) \frac{dX}{dz} \right\} / (S C_{p_r} + S C_{p_{IH_2O}} X) \dots \dots \dots (9)$$

Neraca massa air total :

$$y = \frac{S(X - X_i)}{G} + y_o \dots \dots \dots (10)$$

Neraca panas total :

$$T = [(S C_{p_r} + S C_{p_{IH_2O}} X)(T_r - T_r) - (S C_{p_r} + S C_{p_{IH_2O}} X_i) \\ (T_{si} - T_r) + \pi DzU (T_{gas} - T_{ud}) + (G C_{p_{ud}} + G y_o C_{p_{gH_2O}}) \\ (T_o - T_r) + G(y_o - y) \lambda_{TR}] / (G C_{p_{ud}} + G y C_{p_{gH_2O}}) \dots (11)$$

Persamaan-persamaan lain yang tersedia adalah

$$y^* = \frac{p_{H_2O}^o}{P_r - p_{H_2O}^o} \times \frac{BM_{H_2O}}{BM_{udara}} \dots (12)$$

$$\log_{10} p_{H_2O}^o = 7,96681 - \frac{1668,21}{T - 45} \dots \dots \dots (13)$$

$$Ua = \frac{0,00045.15}{D.30,48} \left(\frac{3600.G.4.30,482}{453,6.3,14.D^2} \right) \dots \dots (14)$$

$$(k_y a)_{const} = 0,0000082 \dots \dots \dots (15)$$

$$(k_y a)_{falling} = \frac{X}{X_{const}} (k_y a)_{const} \dots \dots \dots (16)$$

Salah satu kondisi operasi dan ukuran rotary drier yang bisa dipakai, ditunjukkan dalam print-out komputer berikut dan gambar 3 dan gambar 4.

PROGRAM PERANCANGAN ROTARY DRIER

Oleh :
Tutik Herlina
13298/TK

Pembimbing :
Ir. Wahyudi Budi Sediawan, SU, Ph.D.

<< tekan tombol RETURN untuk melanjutkan >>

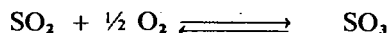
- | | |
|--|-------------------------------|
| 1. laju umpan padatan kering masuk | (g pdt krg/det) = 128.3947 |
| 2. laju udara kering masuk | (g ud krg/det) = 2000 |
| 3. kadar air minimum periode konstan | (g air/g pdt krg) = 0.05 |
| 4. kadar air dalam umpan padatan | (g air/g pdt krg) = 0.1466 |
| 5. kadar air padatan keluar drier | (g air/g pdt krg) = 0.01 |
| 6. kadar air udara keluar drier | (g air/g ud krg) = 0.026 |
| 7. temperatur padatan masuk drier | (der K) = 305 |
| 8. temperatur udara keluar drier | (der K) = 370 |
| 9. temperatur dinding rata-rata | (der K) = 380 |
| 10. temperatur referensi | (der K) = 273 |
| 11. interval panjang | (cm) = 10 |
| 12. interval untuk mencetak hasil | (cm) = 50 |
| 13. diameter drier | (cm) = 170 |
| 14. tekanan operasi | (mm/Hg) = 760 |
| 15. kapasitas panas padatan | (kal/g der K) = 0.32 |
| 16. kapasitas panas udara | (kal/g der K) = 0.25 |
| 17. kapasitas panas air | (kal/g der K) = 1 |
| 18. kapasitas panas uap air | (kal/g der K) = 0.45 |
| 19. koefisien transfer massa total | (g ud krg/det cc) = 0.0000082 |
| 20. panas laten penguapan air pada 273 K | (kal/g) = 597.7 |

<< tekan tombol RETURN untuk melanjutkan >>

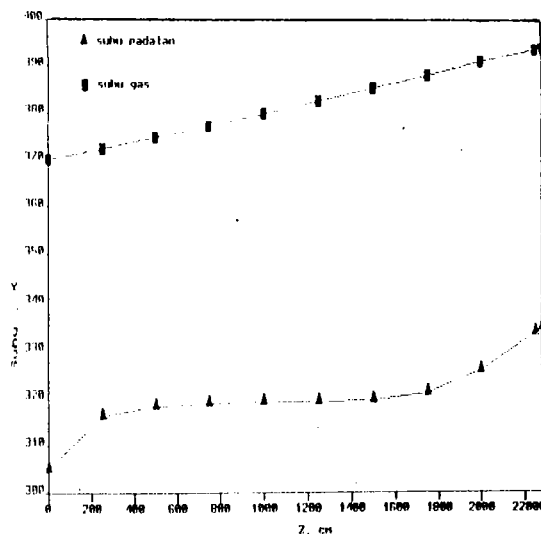
Optimasi

Pemakaian simulasi komputer untuk optimasi ditunjukkan dalam contoh berikut.

Reaksi bolak-balik fasa gas eksotermis



dijalankan dalam fixed bed reaktor yang bekerja adiabatik. Umpan reaktor berjumlah 55000 kg/jam, dengan komposisi $\text{SO}_2 = 7,8\%$, $\text{O}_2 = 10,8\%$ dan $\text{N}_2 = 81,4\%$. Tekanan reaktor dianggap tetap 1 atm. Konversi yang diinginkan (SO_2) = 0.64. Karena reaksi bolak-balik dan eksotermis, maka perlu dicari suhu masuk yang paling optimal, dalam hal ini, yang memberikan berat katalisator minimum.

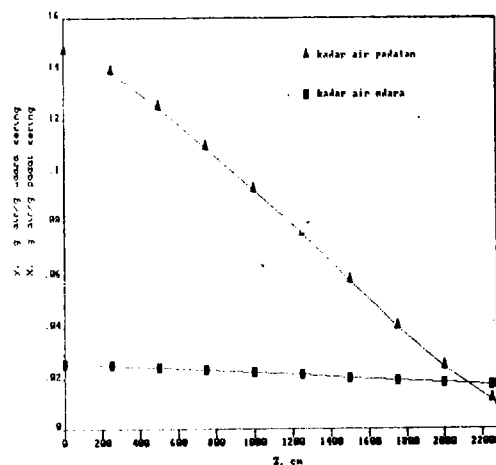


Gambar 3. Hubungan suhu dan panjang drier



Model matematis yang tersusun :

$$W = 137,3 \int_{x=0}^{x=0,64} \frac{1}{r} dX \dots \dots \dots (17)$$



Gambar 4. Hubungan kadar air padatan dan udara dengan panjang drier

Dalam hal ini persamaan kecepatan reaksinya dapat dinyatakan dalam persamaan-persamaan (Froment, 1979) :

$$r = \frac{k_1 p_{O_2} p_{SO_2} (1 - \frac{p_{SO_3}}{p_{SO_2} p_{O_2}^{1/2} K_p})}{22,414(1 + k_2 p_{SO_2} + k_3 p_{SO_3})^2} \quad (18)$$

$$k_1 = \exp(12,16 - \frac{5473}{T}) \quad (19)$$

$$k_2 = \exp(-9,953 + \frac{8619}{T}) \quad (20)$$

$$k_3 = \exp(-71,745 + \frac{52596}{T}) \quad (21)$$

$$K_p = \exp(\frac{11300}{T} - 10,68) \quad (22)$$

$$P_{SO_2} = \frac{1 - X}{12,82 - 0,5 X} \quad (23)$$

$$P_{SO_2} = \frac{1,3846 - 0,5 X}{12,82 - 0,5 X} \quad (24)$$

$$P_{SO_3} = \frac{X}{12,82 - 0,5 X} \quad (25)$$

Dari neraca panas diperoleh :

$$T = T_o + 241,7 X \quad (26)$$

Dalam problem optimasi ini, diinginkan

$$W = f(T_o) \quad (27)$$

yang minimum. Minimasi dijalankan dengan cara numeris dengan *golden section* (Rudd, 1968). Dalam hal ini integrasi persamaan (17) dijalankan secara numeris dengan Simpson's composite rule (Burden, 1985). Hasilnya ditunjukkan dalam print-out komputer berikut.

RUN

BATAS AWAL OPTIMASI (TOA) = ? 600
 BATAS AKHIR OPTIMASI (TOB) = ? 750
 INTERVAL AKHIR = ? 0.1
 KONVERSI MASUK REAKTOR = ? 0
 KONVERSI KELUAR REAKTOR = ? .64
 JUMLAH INTERVAL UNTUK INTEGRASI = ? 40

| TOA | TOB | WA | WB |
|---------|---------|-----------------|----------|
| 600.000 | 750.000 | 39998500000.000 | 7309.522 |
| 657.295 | 750.000 | 29766.700 | 7309.522 |
| 692.705 | 750.000 | 4968.828 | 7309.522 |
| 714.590 | 750.000 | 3582.747 | 7309.522 |
| 728.115 | 750.000 | 3147.556 | 7309.522 |
| 728.115 | 741.641 | 3147.556 | 3014.127 |
| 733.282 | 741.641 | 3049.457 | 3014.127 |
| 736.475 | 741.641 | 3012.750 | 3014.127 |
| 738.448 | 741.641 | 3002.228 | 3014.127 |
| 738.448 | 740.421 | 3002.228 | 3004.325 |
| 738.448 | 739.668 | 3002.228 | 3001.766 |
| 738.914 | 739.668 | 3001.438 | 3001.766 |
| 738.914 | 739.380 | 3001.438 | 3001.394 |
| 739.092 | 739.380 | 3001.330 | 3001.394 |
| 739.092 | 739.270 | 3001.330 | 3001.333 |
| 739.092 | 739.202 | 3001.330 | 3001.318 |
| 739.134 | 739.202 | 3001.319 | 3001.318 |

SUHU MASUK REAKTOR = 739.1676 K
 BERAT KATALISATOR MINIMUM = 3001.318 KG

Daftar Lambang

A : faktor tumbukan
 C_{pi} : kapasitas panas *i*
 D : diameter
 D_L : difusivitas
 E : % solut tersisa
 E : energi aktivasi (reaktor tabung)
 F_{AO} : kecepatan molal umpan
 G : kecepatan massa udara
 ΔH_R : entalpi reaksi
 k : konstanta kecepatan reaksi
 k_y a : koefisien transfer massa
 L : panjang tabung
 P : tekanan total
 p_i : tekanan parsial *i*

| | |
|-------------|--|
| p° | : tekanan uap murni / |
| r | : kecepatan reaksi |
| R | : tetapan gas |
| S | : kecepatan massa padatan |
| t | : waktu |
| T | : suhu |
| U | : koefisien transfer panas over all |
| W | : berat katalis |
| X | : kadar air padatan, g air/g padatan (pada drying) |
| X | : konversi (pada reaktor fixed bed) |
| y | : kadar air udara |
| Z | : konversi (pada reaktor tabung) |
| Z | : jarak (pada drying) |
| λ | : panas laten penguapan |

Daftar Pustaka

- Burden, R.L. and Faires, J.D., 1985, "Numerical Analysis", 3rd ed., Prindle, Weber and Schmidt, Reactor Analysis and Design", pp. 493 — 495, John Wiley and Sons, New York.
- Herlina, T., 1990, "Prarancangan Pabrik Magnesium Hidroksid dari Bittern dan Kapur", Tugas akhir Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknis, Universitas Gadjah Mada.
- Mickley, H.S., Sherwood, T.S. and Reed, C.E., 1957, "Applied Mathematics in Chemical Engineering", p. 105 McGraw-Hill Publishing Co. Ltd., New York.
- Piret, E.L., 1951, *Chem. Eng. Progr.*, 47, 8, 405 — 414.
- Rudd, D.E. and Watson, C.C., 1968, "Strategy of Process Engineering", John Wiley and Sons, New York.